Table 8. Interatomic distances (Å) and angles (deg.)

CA	O1	2.3655 ± 0.0005	(1 0 0 0)
CA	O1	2.3655 ± 0.0005	(2 0 0 0)
CA	O2	2.3476 ± 0.0004	(-101 0 0 1)
CA	O2	2.3476 ± 0.0004	(-102-1 0-1)
CA	O3	2.5667 ± 0.0005	(101-1 0-1)
CA	O3	2.7212 ± 0.0005	(-101 0 0 1)
CA	O3	2.5667 ± 0.0005	(102 0 0 1)
CA	O3	2.7212 ± 0.0005	(-102-1 0-1)

O1	CA	O1	72.12 ± 0.02	(1 0 0 0)	(2 0 0 0)
O1	CA	O2	83.41 ± 0.02	(1 0 0 0)	(-101 0 0 1)
O1	CA	O2	78.34 ± 0.02	(1 0 0 0)	(-102-1 0-1)
O1	CA	O3	136.39 ± 0.01	(1 0 0 0)	(101-1 0-1)
O1	CA	O3	90.82 ± 0.01	(1 0 0 0)	(-101 0 0 1)
O1	CA	O3	119.57 ± 0.01	(1 0 0 0)	(102 0 0 1)
O1	CA	O3	160.69 ± 0.02	(1 0 0 0)	(-102-1 0-1)
O1	CA	O2	78.34 ± 0.02	(2 0 0 0)	(-101 0 0 1)
O1	CA	O2	83.41 ± 0.02	(2 0 0 0)	(-102-1 0-1)
O1	CA	O3	119.57 ± 0.01	(2 0 0 0)	(101-1 0-1)
O1	CA	O3	160.69 ± 0.02	(2 0 0 0)	(-101 0 0 1)
O1	CA	O3	136.39 ± 0.01	(2 0 0 0)	(102 0 0 1)
O1	CA	O3	90.82 ± 0.01	(2 0 0 0)	(-102-1 0-1)
O2	CA	O2	157.40 ± 0.02	(-101 0 0 1)	(-102-1 0-1)
O2	CA	O3	138.35 ± 0.02	(-101 0 0 1)	(101-1 0-1)
O2	CA	O3	109.33 ± 0.01	(-101 0 0 1)	(-101 0 0 1)
O2	CA	O3	63.12 ± 0.02	(-101 0 0 1)	(102 0 0 1)
O2	CA	O3	84.33 ± 0.02	(-101 0 0 1)	(-102-1 0-1)
O2	CA	O3	63.12 ± 0.02	(-102-1 0-1)	(101-1 0-1)
O2	CA	O3	84.33 ± 0.02	(-102-1 0-1)	(-101 0 0 1)
O2	CA	O3	138.35 ± 0.02	(-102-1 0-1)	(102 0 0 1)
O2	CA	O3	109.33 ± 0.01	(-102-1 0-1)	(-102-1 0-1)
O3	CA	O3	66.92 ± 0.02	(101-1 0-1)	(-101 0 0 1)
O3	CA	O3	82.29 ± 0.02	(101-1 0-1)	(102 0 0 1)
O3	CA	O3	59.97 ± 0.01	(101-1 0-1)	(-102-1 0-1)
O3	CA	O3	59.97 ± 0.01	(-101 0 0 1)	(102 0 0 1)
O3	CA	O3	107.32 ± 0.02	(-101 0 0 1)	(-102-1 0-1)
O3	CA	O3	66.92 ± 0.02	(102 0 0 1)	(-102-1 0-1)

MG	O1	2.1212 ± 0.0005	(1 0 1 0)
MG	O1	2.0634 ± 0.0005	(-1 0 1 0)
MG	O1	2.1212 ± 0.0005	(2 0 1 0)
MG	O1	2.0634 ± 0.0005	(-2 0 1 0)
MG	O2	2.0564 ± 0.0005	(101-1 0 0)
MG	O2	2.0564 ± 0.0005	(102 0 0 0)

O1	MG	O1	84.59 ± 0.02	(1 0 1 0)	(-1 0 1 0)
O1	MG	O1	82.06 ± 0.03	(1 0 1 0)	(2 0 1 0)
O1	MG	O1	93.83 ± 0.02	(1 0 1 0)	(-2 0 1 0)
O1	MG	O2	171.40 ± 0.02	(1 0 1 0)	(101-1 0 0)
O1	MG	O2	92.82 ± 0.02	(1 0 1 0)	(102 0 0 0)
O1	MG	O1	93.83 ± 0.02	(-1 0 1 0)	(2 0 1 0)
O1	MG	O1	177.92 ± 0.03	(-1 0 1 0)	(-2 0 1 0)
O1	MG	O2	88.89 ± 0.02	(-1 0 1 0)	(101-1 0 0)
O1	MG	O2	92.54 ± 0.02	(-1 0 1 0)	(102 0 0 0)
O1	MG	O1	84.59 ± 0.02	(2 0 1 0)	(-2 0 1 0)
O1	MG	O2	92.82 ± 0.02	(2 0 1 0)	(101-1 0 0)
O1	MG	O2	171.40 ± 0.02	(2 0 1 0)	(102 0 0 0)

O1	MG	O2	92.54 ± 0.02	(-2 0 1 0)	(101-1 0 0)
O1	MG	O2	88.89 ± 0.02	(-2 0 1 0)	(102 0 0 0)
O2	MG	O2	93.06 ± 0.03	(101-1 0 0)	(102 0 0 0)

SI	O1	1.6028 ± 0.0005	(1 0 0 0)	
SI	O2	1.5900 ± 0.0005	(1 0 0 0)	
SI	O3	1.6681 ± 0.0005	(1 0 0-1)	
SI	O3	1.6899 ± 0.0005	(-2 0 0-1)	

O1	SI	O2	118.16 ± 0.03	(1 0 0 0)	(1 0 0 0)
O1	SI	O3	110.37 ± 0.02	(1 0 0 0)	(1 0 0-1)
O1	SI	O3	109.92 ± 0.02	(1 0 0 0)	(-2 0 0-1)
O2	SI	O3	109.65 ± 0.03	(1 0 0 0)	(1 0 0-1)
O2	SI	O3	103.64 ± 0.02	(1 0 0 0)	(-2 0 0-1)
O3	SI	O3	104.00 ± 0.02	(1 0 0-1)	(-2 0 0-1)